

LINEARIZAÇÃO NA MODELAGEM DO PROCESSO DE BIODEGRADAÇÃO

Neyva M.L. Romeiro – nromeiro@uel.br – Universidade Estadual de Londrina

Rigoberto Gregorio Sanabria Castro – sanabria@uenf.br – Universidade Estadual do Norte Fluminense

INTRODUÇÃO

Modelos de biodegradação podem envolver processos de reações lineares e não lineares, ou ainda linearizados:

PROCESSOS LINEARES

Vantagens

Representa um decaimento exponencial; Possui esquema de solução simples.

Desvantagens (pode)

Impedir considerações de condições bioquímicas; Refletir condições de campo não exatas; Produzir valores de degradação incorretos (não distingue entre condições aeróbicas e anaeróbicas).

PROCESSO NÃO LINEAR

Vantagens

Facilidade na calibração do modelo devido à flexibilidade introduzida via os parâmetros cinéticos; Distingue entre condições aeróbicas e anaeróbicas.

Desvantagem

Esquema de solução requer um enorme esforço computacional.

PROCESSOS LINEARIZADOS

Vantagens

Reduz a complexidade e melhorar a eficiência do modelo numérico; Distingue entre condições aeróbicas e anaeróbicas; Possui esquema de solução simples;

Desvantagem

Aumenta o número de termos no modelo.

MODELO NÃO LINEAR

O modelo não linear de biodegradação é (Celia et al., 1989) :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + v \frac{\partial c_1}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \left(\frac{V_m^i X_1 \delta_1}{k_h^i + c_1} \right) c_1 + k_{12} \left(\frac{V_m^j X_1 \delta_2}{k_h^j + c_2} \right) c_2 = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + v \frac{\partial c_2}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \left(\frac{V_m^j X_1 \delta_2}{k_h^j + c_2} \right) c_2 + k_{21} \left(\frac{V_m^i X_1 \delta_1}{k_h^i + c_1} \right) c_1 = 0 \quad (2)$$

c_1 , c_2 e X_1 referem-se as concentrações do oxigênio dissolvido, do carbono orgânico e da bactéria aeróbica, respectivamente; V_m^i é a taxa de absorção para a espécie i ; k_h^i é a constante de meia saturação para a espécie i ; k_{ij} é o coeficiente de produção da espécie i quando a espécie j é limitante; δ_i é igual a 1 se a espécie i for limitante e zero caso contrário; v é o coeficiente de advecção; D é o coeficiente de difusão; x é a variável espacial e t é a variável temporal.

Considera-se que a espécie cuja concentração estiver em menor quantidade será a limitante naquele ponto.

MODELO LINEARIZADO

O modelo linearizado de biodegradação é obtido utilizando a primeira ordem da expansão em série de Taylor (Romeiro et al., 2002 e 2003)

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + v \frac{\partial c_1}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \left(\frac{V_m^i X_1 \delta_1 k_h^i}{(k_h^i + \bar{c}_1)^2} \right) c_1 + k_{12} \left(\frac{V_m^j X_1 \delta_2 k_h^j}{(k_h^j + \bar{c}_2)^2} \right) c_2 + \left(\frac{V_m^j X_1 \delta_2}{k_h^j + \bar{c}_2} - \frac{V_m^j X_1 \delta_2 k_h^j}{(k_h^j + \bar{c}_2)^2} \right) \bar{c}_2 + k_{12} \left(\frac{V_m^i X_1 \delta_1}{k_h^i + \bar{c}_1} - \frac{V_m^i X_1 \delta_1 k_h^i}{(k_h^i + \bar{c}_1)^2} \right) \bar{c}_1 = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + v \frac{\partial c_2}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \left(\frac{V_m^j X_1 \delta_2 k_h^j}{(k_h^j + \bar{c}_2)^2} \right) c_2 + k_{21} \left(\frac{V_m^i X_1 \delta_1 k_h^i}{(k_h^i + \bar{c}_1)^2} \right) c_1 + \left(\frac{V_m^i X_1 \delta_1}{k_h^i + \bar{c}_1} - \frac{V_m^i X_1 \delta_1 k_h^i}{(k_h^i + \bar{c}_1)^2} \right) \bar{c}_1 + k_{21} \left(\frac{V_m^j X_1 \delta_2}{k_h^j + \bar{c}_2} - \frac{V_m^j X_1 \delta_2 k_h^j}{(k_h^j + \bar{c}_2)^2} \right) \bar{c}_2 = 0 \quad (4)$$

onde \bar{c}_i refere-se ao valor da espécie i no instante de referência do termo não linear.

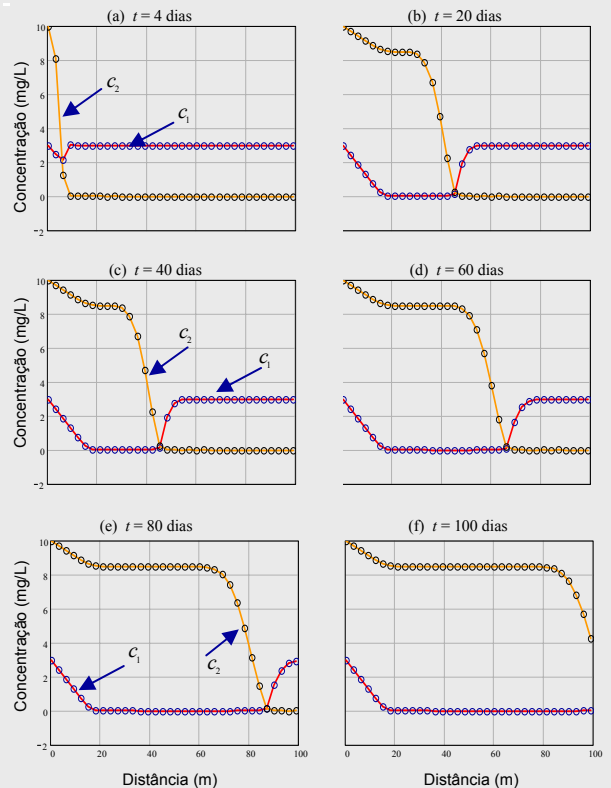
RESULTADOS NUMÉRICOS

Considerando o processo do transporte em uma dimensão, verifica-se a validade da linearização aplicada no modelo de biodegradação não linear comparando as soluções numéricas dos modelos: não linear, equações (1)-(2), e linearizado, equações (3)-(4). Utiliza-se um canal com uma distância de 100 metros, 100 elementos lineares e 101 nós, a velocidade $v=1.0 \text{ md}^{-1}$, a difusão é $D=0.2 \text{ m}^2\text{d}^{-1}$, $\Delta x=1.0$ e $\Delta t=0.2$.

No exemplo hipotético, as concentrações do oxigênio dissolvido e do carbono orgânico no contorno esquerdo são 3.0 e 10.0 mg/L, respectivamente. Para o contorno direito, o gradiente de ambas as concentrações são fixadas em zero. Os demais parâmetros utilizados para descrever o processo de biodegradação são:

$V_m^i=1.0 \text{ d}^{-1}$, $k_h^i=0.1 \text{ mg/L}$, $k_{12}=2.0$ e $k_{21}=0.5$. A espécie estacionária é fixada em $X_1=0.2 \text{ mg/L}$.

O tempo total de simulação foi de 100 dias e os resultados numéricos encontram-se nas Figuras 1(a)-(f).



Figuras 1(a)-(f): Soluções do modelo de biodegradação: Modelo não linear (linha contínua) e Modelo linearizado (símbolo)

CONCLUSÕES

Pode-se observar, Figuras 1(a)-(f), que os modelos não linear e linearizado apresentam soluções próximas, confirmando assim, a eficiência do método numérico utilizado, bem como a técnica utilizada para linearizar o modelo.

Verifica-se também que o desenvolvimento utilizado para linearizar o modelo gerou termos de ordem zero nas equações de transporte advectiva difusiva do modelo.

REFERÊNCIAS

- CELIA, M. A., KINDRED, J.S. Contaminant transport and biodegradation 1. A numerical model and test simulations. *Water Resources Research*, 25 (6), pp 1149-1159.
- ROMEIRO, N. M. L., CASTRO, R. G. S., LANDAU, L. Análise comparativa de modelos de transporte de poluentes com reações cinéticas linear, linearizadas e não linear. 56^o Seminário Brasileira de Análise (SBA). Niterói, Rio de Janeiro, Brasil, 917- 927, 2002.
- ROMEIRO, N. M. L., CASTRO, R. G. S., LANDAU, L. Modelo Acoplado de Transporte de Poluentes de Múltiplas Espécies com Reações Cinéticas Não Lineares. 58^o Seminário Brasileira de Análise (SBA), Campinas, São Paulo, Brasil, 465- 472, 2003.

